

Vol.8 2012

ANNUAL REPORT

Department of Material Science
Graduate School of Science
Josai University

城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻

Annual Report

Department of Material Science
Graduate School of Science
Josai University

Vol. 8

March 2012

城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻

**Copyrighted materials in this publication were reproduced
with permission from the copyright owners.**

目次

研究紹介

情報科学部門

情報科学研究室	1
---------	---

分子物性光学部門

分子分光学研究室	2
----------	---

物質機能部門

反応動力学研究室	3
----------	---

分子集合体科学研究室	4
------------	---

分子設計部門

物理有機化学研究室	5
-----------	---

合成有機化学研究室	6
-----------	---

天然物有機化学研究室	7
------------	---

修士論文発表会	8
---------	---

修士課程中間発表会	9
-----------	---

サイエンス・ビジネス・セミナー	10
-----------------	----

2011 年度 業績リスト

研究論文	11
------	----

学会発表	12
------	----

論文別刷	16
------	----

量子化学に基づく非経験的分子軌道法や高次元アルゴリズムに基づく分子動力学法といった手法を用いた分子の機能や物性の解析が中心的研究テーマである。特に分子構造の変化や化学反応に関する様々な問題についてアプローチを行っている。

最近の研究例を以下に紹介する。

高次元アルゴリズムを用いてプロトン化水クラスター(PWC)多量体の計算を行っている。PWC は生体内の空間に存在するといわれており、重要な物質である。高次元アルゴリズムを用いた最適化計算により 7 量体までの既知の重要な安定構造を計算することができた。今後は現在まで計算が行われていない 8 量体以上についての構造探索を行っていく予定である。

ルチジン誘導体は近年問題となっているホルムアルデヒドの検出物質である。本研究室ではルチジン誘導体の基底状態ならびに励起状態の解明を行ってきたが¹⁾、より詳細に出発物質である β -ジケトンの置換基効果を解明するためには、反応機構の解明が必要であり、非経験的分子軌道計算により反応経路の解明を試みている。

高次元アルゴリズム計算を行うにあたって、混合性パラメータは非常に重要であり、従来は混合性を表す固有ベクトルに対応する固有値を一次関数でフィットして求めていた。より強い混合性を表すため、二次関数や四次関数などより高次の関数を使用した時の挙動を、ブタン分子を例にとりあげて、計算結果の比較を行った。その結果、時間パラメータを縮小したような効果を認めることができた。N-acetyl L-histidine N'-methyl amide とそれらに 4 つの水分子が水和した構造を HF/3-21G, B3LYP/6-31G**, PCM B3LYP/aug-ccpVDZ のそれぞれについて容易に求めることができることを示し、近年提案されている様々な最適化法との比較を行った²⁾。

1) "Theoretical study on ground and excited states of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine" , H. Teramae, Y. Y. Maruo, and J. Nakamura, *J. Chem. Model.*, in press.

2) "Mixing parameters for geometry optimization using the Hamiltonian algorithm", Hiroyuki Teramae, Takayoshi Ishimoto, and Umpei Nagashima, *Theoret. Chem. Acc.*, **130**, 671-678 (2011).

我々は二原子分子の分子構造をどこまでも精密に決定してゆくという観点の下、non-Born-Oppenheimer の取扱いを実験、理論の両面から検討して精密な構造決定を行っている。non-Born-Oppenheimer の取扱いの基本は Uehara, Ogilvie [*J. Mol. Spectrosc.* **207**, 143-152 (2001)] に、non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian は Uehara [*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **77**, 2189-2191 (2004)] に、また、non-Born-Oppenheimer 解析の benchmark として HF 分子に当該 Hamiltonian を適用した結果を Uehara et al. [*J. Phys. Chem. A*, **113**, 10435-10445 (2009)] に報告している。さらに DF 分子について、HF 分子との同時解析を当該 non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian を用いて行なった [Horiai, Uehara, *Chem. Phys.* **380**, 92-97 (2011)]。これまで報告されている HF, DF の同時解析では、HF, DF 分子に対して別々の分子定数が決定されている。しかし、我々の解析では HF, DF 分子に対してただ一組の分子定数が決定される。F 原子は安定同位体がないので我々の分子定数は *irreducible molecular constant* と言える。

これまでの解析で、我々の non-Born-Oppenheimer Hamiltonian はサブミリ波、TuFIR、heterodyne 分光を含む高精度な回転スペクトル、振動回転スペクトルを、多数の振動励起状態、種々の同位体種のものを含んで精度良く単一 fit して、伝統的分子定数に基づいた non-Born-Oppenheimer 分子定数を与えることが明らかになっている。

この解析方法の利点を十分に発揮するには、スペクトルデータセットは可能な限り高分解能、高精度である必要がある。本学には超高分解能フーリエ変換赤外分光器 Bruker IFS125HR が設置されている。本分光器の最高分解能で高温分子の振動回転スペクトルを観測し、高精度でスペクトル位置を決定する。高精度にスペクトル位置を決定するために (1) 試料スペクトルと波長標準スペクトルの同時測定、(2) Origin によるスペクトル線形 fit での中心波数決定、を行なう。

(1) の同時測定は試料スペクトルと波長標準スペクトル二重光束光学系を作ったが所期の結果が得られなかった。試料セルと標準セルを直列に配置した系では使用できるスペクトルが得られた。観測したスペクトルは CS と AIF である。(2) の検討では CS, AIF, HCl の 3000 本余りのスペクトルを Origin でスペクトル線形に fit してスペクトル波数を決定した。これらは non-Born-Oppenheimer Hamiltonian を用いて解析し (第 5 回分子科学討論会、札幌、3P016, 017)、これまでに報告されている種々の情報と対照して、所期のスペクトル精度 $\pm 0.0002 \text{ cm}^{-1}$ が得られているかどうかを確認している。

なお、我々の non-Born-Oppenheimer 解析の方法は comprehensive review により公表することになっている。

超高温状態における分子の反応ダイナミックスの観測を行い、高温機能性分子の開発を目指す。その応用として合成分子の超高温下における機能や物性の解析によって分子構造の変化や化学反応に関する様々な問題についてアプローチを行っていく。

最近の研究例を以下に紹介する。

太陽光を高度に集光し、主に集光した紫外・可視光の光子を効率良く熱変換し、2500℃以上の高温炉の作成を行なっている。

今後は作成した高温炉を用いて 2500℃以上で起こる様々な高温特有な化学反応を利用して高温機能性物質の開発を行う。また太陽エネルギーを利用した高効率の熱発電システムの開発を目指す。

弱い van der Waals 力により分子が結合した集合体、分子クラスター、は構成分子数が有限であるため気体や液体・固体とは異なった状態にあり、特有の性質をもつ。このためクラスターの物性の研究はあらたな機能性材料の開発につながる可能性がある。本研究室では、数個の分子が集合した van der Waals 錯体の高分解能赤外分光を行うことにより、その構造や分子間ポテンシャルを決定している。さらに、van der Waals 錯体の構造などの量子化学計算を行い、実験結果と比較して van der Waals 錯体特有の性質について研究している。また以上の研究の応用として、最近環境問題として取り上げられてきている揮発性有機化合物（VOC）について、赤外分光などを利用した小型センサの開発を行っている。昨年行った主な研究テーマを以下に示す。

- (1) van der Waals 錯体 $\text{N}_2\text{--CO}_2$ 中で、 N_2 の秤動がどのように錯体の振動平均構造に影響するかを量子化学計算により調べた。結果を以前に行った $\text{N}_2\text{--CO}_2$ 錯体のパルスジェットー赤外ダイオードレーザー分光による高分解能赤外スペクトルから得られた結果と比較した。
- (2) 大気汚染物質である揮発性有機化合物の簡便なセンサの開発を行うための校正ガス発生法を検討した。校正ガス中のトルエン濃度を測定するため、長光路セルと FTIR 分光器により約 0.5~10 ppm の濃度で測定する方法、特に、低濃度トルエンの場合の水の影響の除去方法を調べた。発生させた校正ガスをナノ孔ガラスに導き、近赤外分光法でトルエン濃度を測定した。
- (3) 近赤外分光、赤外分光および密度汎関数法を用いて、ピロールの NH 伸縮振動の基本音と倍音の吸収強度と振動数の溶媒効果について調べた。

計算機化学と称される分子力学法・分子動力学法および分子軌道法を駆使して、有機化合物の電子状態とそれらの物理化学的諸量との関連を研究している。Molecular Operating Environment (MOE) により、定量的構造活性相関 (QSAR) および Protein-Ligand Docking に焦点を当て、一定の成果を得ている。

また、15台からなる PC クラスターを利用して、MOE により得られた Protein-Ligand Docking 構造を FMO-HF 法により Protein-Ligand の全電子計算を行い、Ligand 周辺のアミノ酸残基との相互作用解析を行っている。また、Docking ソフト GOLD を用いて MOE から得られる Docking 構造との比較を行い、PDB から取得した構造の妥当性の検討も同時に行っている。

以下のような幾つかのテーマに大別することができる。

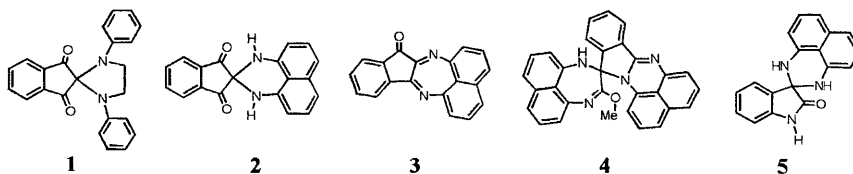
- (1) 非経験的分子軌道法を用いた Tetrazole 類の熱分解機構の検討
- (2) Molecular Operating Environment (MOE) を用いた抗精神病薬 Phenothiazine 類の標的受容体の網羅的探索
- (3) Molecular Operating Environment (MOE) による抗 HIV 活性剤 ADAMs の QSAR 解析とタンパク質とのドッキングの研究
- (4) MOE を用いた 4-Trifluoromethylimidazole 類および 3-Formylchromone 類の QSAR および Protein-Ligand Docking
- (5) MOE を用いた抗血小板凝集作用を有する Pyrazine 類の QSAR およ Protein-Ligand Docking

MOE 中にある Auto-GPA を用いての QSAR 解析と Protein-Ligand Docking の結果を併せてリード化合物の探索・設計にかなりの精度で近づける可能性があることを示唆された研究結果が得られたと確信している。また、標的受容体が不明な場合でも網羅的探索への方法論も確立されたと考えている。

特異な機能や物性を示す π 共役系化合物の創出を目指して、安定な π ラジカル、プロトン移動や光応答性を有する化合物、超分子結晶を与える水素結合性化合物などを分子設計し、合成と機能探索を行っている。本年度は主に、スピロ共役化合物の合成と反応を中心に研究を展開した。

〔1〕 ジアミン類によるスピロ共役化合物の合成

ニンヒドリンと *N,N*-ジフェニルエチレンジアミンとの反応によりスピロ化合物 **1** が、1,8-ジアミノナフタレンとの反応によりスピロ化合物 **2** が、それぞれ赤色の結晶として得られた。その他、ジアザプレイアジエン誘導体 **3** および転位を伴ったスピロ型縮合生成物 **4** など意外な生成物が単離された。

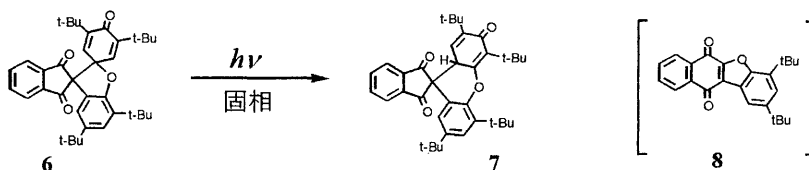


UV スペクトルと DFT 計算 (B3LYP/6-31G**) を中心に電子状態を検討した結果、スピロ接合を介する電荷移動吸収が着色の要因であることを明らかにした。

イサチンに対して同様にジアミンを反応させることにより、スピロ共役化合物 **5** のほか、興味深い転位生成物が幾つか得られた。

〔2〕 スピロ共役化合物の光転位反応¹⁾

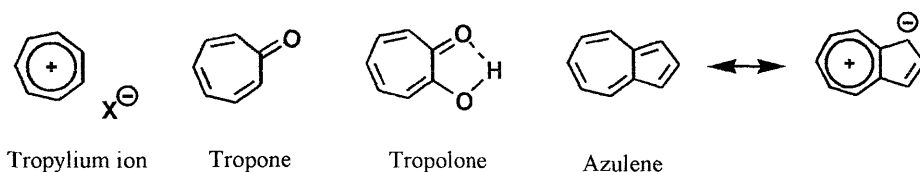
スピロシクロヘキサジエン化合物 **6** の CH₃CN 溶媒和単結晶および多結晶に光照射したところ、転位体 **7** がいずれも唯一の生成物として得られた。溶液中ではこのほか **8** も生成した。溶媒を脱離させた **6** の多結晶についても同様の結果が得られた。溶媒脱離多結晶については、粉末X線回折データから Rietveld 法をもちいて結晶構造解析を行い、溶媒和結晶との結晶構造の違いを明らかにし、この固相反応の機構との関連を議論した。



1) M. Suzuki, K. Imai, H. Wakabayashi, A. Arita, K. Johmoto, H. Uekusa, and, K. Kobayashi, *Tetrahedron*, **67**, 5500-5506 (2011)

非ベンゼン系芳香族化合物に属する七員環骨格を有するトロポン、トロポロン等のトロポノイドおよび七員環と五員環が縮環したアズレンやグアイアズレン等のアズレノイドの化学に関する研究を行っている。

特にナフタレンの構造異性体でもあるアズレンは、 $C_{10}H_8$ のような簡単な炭化水素にもかかわらず、鮮やかな青色を持つ興味深い化合物である。



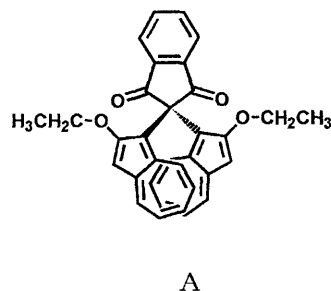
本年度の研究テーマは、

(1) トロポノイドおよびアズレノイドの合成：

七員環を含むトロポノイド及びアズレノイドの合成とその性状を検討の一端として、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジンの複素環交換反応を利用したベンゾオキサジン類のアルキル誘導体の合成と性状について研究を行なった。

(2) アズレン類とニンヒドリンとの反応：

小林啓二教授らにより、ニンヒドリンとフェノール類の反応で興味深い結果が報告されている。本年度も昨年に引き続き、フェノールの代わりにアルコキシアズレン、アルキルアズレンやヘテロを含むアズレン類との反応を検討した。その結果、ニンヒドリンとアズレンが 1:1、1:2、2:3、さらに 6:7 までは鎖状に繋がった化合物および軸性キラリティーを示す化合物 (A) が得られた。



(3) トロポン及びアズレン類の薬理活性の研究：

天然に存在するヒノキチオールやグアイアズレンなどをはじめとするトロポン及びアズレン類には薬理活性を示すものが多く知られている。当研究室では、10 年程前から明海大学の坂上 宏 教授との共同研究により、比較のために 100 種以上ものトロポンおよびアズレン類の薬理活性の研究もおこなっている。本年度も昨年に引き続き、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジン誘導体の腫瘍選択性や NO 産生抑制に関して検討した。

第7回 理学研究科物質科学専攻修士論文発表会プログラム

2012年2月23日

* 開会挨拶 研究科長

時 間	氏 名	論 文 タ イ ト ル	指 導 教 員
9:30 ~ 9:50	あおやま れいこ 青山 礼子	イサチンの π 共役拡張化合物の合成と性質	小林 啓二 教授
9:50 ~ 10:10	いまい かずのり 今井 一則	1,3-インダンジオンの自己縮合反応に基づく新規 π 共役化合物の合成	小林 啓二 教授
10:10 ~ 10:30	うちだ なおき 内田 直輝	非経験的分子軌道法を用いたTetrazole類の熱分解機構の検討	栗原 照夫 教授
10:30 ~ 10:50	かい やすのり 槐 靖範	CSのスペクトル精度向上と精密解析の研究	上原 博通 教授
11:00 ~ 11:20	さかのした えりこ 坂ノ下 絵里子	2-アリール-1,3-インダンジオンとフェニルヒドラジン類との反応	小林 啓二 教授
11:20 ~ 11:40	とみた じゅんき 富田 惇輝	アルコキシアズレン類とニンヒドリンとの反応	若林 英嗣 教授
11:40 ~ 12:00	なかだ とむひろ 中田 智博	AIFのスペクトル精度向上と精密解析の研究	上原 博通 教授
12:00 ~ 12:20	みやまえ ともしき 宮前 智紀	Molecular Operating Environment (MOE) を用いた Phenothiazine 類および Phenoxazine 類の標的受容体の網羅的探索	栗原 照夫 教授

* 閉会挨拶

2011年度 城西大学大学院理学研究科

物質科学専攻 修士課程中間発表会

会期 2011年12月21日(水)

会場 1-118 教室

1. 水溶性アズレン類の合成とその薬理活性	1
[天然物有機化学研究室]	植木 淳一
2. van der Waals 錯体 N_2 - CO_2 の構造の量子化学計算	2
[分子集合体科学研究室]	女屋 敬
3. 長光路セル - 中赤外分光およびナノ孔ガラス吸着 - 近赤外分光による トルエン気相濃度の測定	3
[分子集合体科学研究室]	加藤 靖子
4. 1,3-ジイミノインダン誘導体の光転位反応.....	4
[合成有機化学研究室]	河合 正行
5. オキシインドール骨格に基づくビスフェノール誘導体の酸化反応	5
[合成有機化学研究室]	高橋 俊介
6. Molecular Operating Environment (MOE) を用いた血小板凝集阻害剤の Alkyl- 及び Arylpyrazine 類の COX-Ligand Docking	6
[物理有機化学研究室]	吉野 龍ノ介

平成23年度 サイエンスビジネスセミナー

坂戸キャンパス(118号室)

9月24日	藤田郁光	富士通 BSC 「我が国 I T 産業の国際環境と国際戦略」
10月 1日	萩原 隆	昭和シェル石油 「知的財産の基礎」
10月 8日	網谷 敦	ナミキ商事ファインケミカル事業部試薬部 「商事会社における化学系技術者に求められるもの」
10月15日	太田多禾夫	ISO14001 RCA CEAR 主任審査員 「技術倫理と企業倫理に求められるもの」
10月22日	市川 勝	東京農業大学客員教授 「木材からバイオエタノールをつくる触媒技術と その実用化にむけて」
10月29日	橋本雅司	キヤノン 厚木中央研究所 「機能性材料ー働く分子のお話」
11月12日	柿沼正久	太陽インキ製造 「IT 産業を支える隠れた主役 ——レジストインクの役割」
11月19日	村山徹郎	元三菱化学チーフサイエンティスト 「新商品開発のプロジェクト X」
11月26日	薄井玲子	社団法人 企業研究会 「産業界での“実のある”異業種交流とは ——CAMMフォーラムを例に」
12月 3日	西 克也 田島澄恵	ベストシステムズ ビヨンドコンピューティング 「ベンチャー企業と研究開発」
12月10日	長澤 浩	ニッタ 事業開発センター 「企業における新規開発と研究・開発者の使命 ——シーズ型開発とニーズ型開発」
12月17日	京極浩史	日本電子分析機器本部 「サイエンスとビジネスの関係 ——バイオテクノロジーをめぐって」

2011 年度 業績リスト

研究論文

LiH の分子軌道エネルギー準位図 -非経験的ハートリー・フォック法を用いて-

Amih Sagan, 長嶋雲兵, 寺前裕之, 長岡伸一
J. Comp. Chem. Jpn., **10**, No.2, 75-77 (2011)

HeH⁺ の分子軌道エネルギー準位図

Amih Sagan, 長岡伸一, 寺前裕之, 長嶋雲兵
J. Comp. Chem. Jpn., **10**, No.4, 147-151 (2011)

Mixing parameters for geometry optimization using the Hamiltonian algorithm

Hiroyuki Teramae, Takayoshi Ishimoto, and Umpei Nagashima
Theoret. Chem. Acc., **130**, 671-678 (2011)

Simultaneous Analysis of Rotational and Vibrational-Rotational Spectra of DF and HF to Obtain Irreducible Molecular Constants for HF

K. Horiai and H. Uehara
Chem. Phys., 380, 92-97 (2011)

Solvent Dependence of Absorption Intensities and Frequencies of the Fundamental and First Overtone of NH Stretching Vibration of Pyrrole Studied by Near-Infrared/Infrared Spectroscopy and Density-Functional-Theory Calculations

Y. Futami, Y. Ozaki, Y. Hamada, M. J. Wojcik, Y. Ozaki
J. Phys. Chem. A, **115**, 1194-1198 (2011)

Infrared Diode Laser Spectroscopy of N₂—¹²C¹⁸O₂

T. Konno, S. Yamaguchi, Y. Ozaki
J. Mol. Spectrosc., **270**, 66-69 (2011)

Photorearrangements in Spiro-Conjoined Cyclohexa-2,5-dien-1-one

M. Suzuki, K. Imai, H. Wakabayashi, A. Arita, K. Johmoto, H. Uekusa, and K. Kobayashi
Tetrahedron, **67**, 5500-5506 (2011)

Supramolecular Networks in Crystalline Inclusion Complexes Formed from a New Host: 2, 2-Bis(4-hydroxy-3-phenylphenyl)-1*H*-indene-1,3(2*H*)-dione
Kenta Kasugai, Suzumi Hashimoto, Kazunori Imai, Aya Sakon, Kotaro Fujii, Hidehiro Uekusa, Naoto, Hayashi, and Keiji Kobayashi
Cryst. Growth Des. **11**, 4044-4052 (2011)

Polymorphism in Solvate Crystals of Indantrione 1,2-Dioxime
Mitsuaki Suzuki and Keiji Kobayashi
Cryst. Growth Des. **11**, 1814-1820 (2011)

Crystal Structure of Benzene-Solvate of Bis(benzophenone) Azine. A Color Polymorph
Kazunori Imai, Mai Takahashi, Rie Ishii, and Keiji Kobayashi
X-ray Structure Analysis Online, **27**, 75-76 (2011)

Hormetic and UV-Protective Effects of Azulene-related Compounds
J. Ueki, A. Shimada, H. Sakagami, and H. Wakabayashi
International Journal of In Vivo Research, **25**, 41-48 (2011)

Quest for Anti-inflammatory Substances Using IL-1b-stimulated Gingival Fibroblasts
M.Ono, K. Kantoh, J. Ueki, A. Shimada, H. Wakabayashi, T. Matsuda, H. Sakagami, H. Kumada, N. Hamada, M. Kitajima, H. Oizumi, and T. Oizumi
International Journal of In Vivo Research, **25**, 763-768 (2011)

学会発表

TD DFT 法による分子内プロトン移動反応に関する研究
寺前裕之, 長岡伸一, 長嶋雲兵
第 14 回理論化学討論会 (岡山), 2011 年 5 月

LiH の分子軌道エネルギー準位図－非経験的ハートリー・フォック法を用いて－
Amih Sagan, 長嶋雲兵, 寺前裕之, 長岡伸一
日本コンピュータ化学会 2011 年春季年会 (東京), 2011 年 6 月

ルチジン誘導体生成の反応機構に関する研究

寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎

日本コンピュータ化学会 2011 年春季年会 (東京), 2011 年 6 月

ルチジン誘導体生成の反応機構に関する研究 (2)

寺前裕之, 丸尾容子

日本コンピュータ化学会 2011 年秋季年会 (福井), 2011 年 11 月

異核 2 原子分子水素化リチウム LiH の分子軌道エネルギー準位図

長嶋雲兵, 寺前裕之, 長岡伸一

分子科学討論会 2011 (札幌), 2011 年 9 月

TD DFT 法による分子内プロトン移動反応の研究(2)

寺前裕之, 長岡伸一, 長嶋雲兵

分子科学討論会 2011 (札幌), 2011 年 9 月

Theoretical study on the reaction mechanism of formation of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine

Hiroyuki Teramae, Yasuko Y. Maruo, and Jiro Nakamura

ISTCP-VII (Tokyo), 2011 年 9 月

Theoretical study on the reaction mechanism of formation of 3,5-diacetyl-1,4-dihydro-2,6-dimethylpyridine

Hiroyuki Teramae and Yasuko Y. Maruo

APCTCC-5 (Rotorua), 2011 年 12 月

二重光束高分解能赤外発光分光による CS の振動回転スペクトルの精密な測定

槐 靖範, 角田典雅, 堀合公威, 上原博通

第 5 回分子科学討論会 (札幌), 2011 年 9 月

二重光束高分解能赤外発光分光による AIF の振動回転スペクトルの精密な測定

中田智博, 槐 靖範, 堀合公威, 上原博通

第 5 回分子科学討論会 (札幌), 2011 年 9 月

van der Waals 錯体 $\text{N}_2-\text{C}^{16}\text{O}_2$, $-\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, $-\text{C}^{18}\text{O}_2$ の構造
— N_2 の回転を考慮した比較—

女屋 敬, 紺野東一, 尾崎裕

第 5 回分子科学討論会 (札幌), 2011 年 9 月

Molecular Operating Environment (MOE) を用いた抗血小板凝集薬としてのアルキル及びアリーールピラジン類の定量的構造活性相関解析

吉野龍ノ介, 栗原照夫

日本化学会第 91 春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

Molecular Operating Environment (MOE) を用いた 4-トリフルオロメチルイミダゾール類及び 3-ホルミルクロモン類の細胞毒性活性濃度の定量的構造活性相関解析

松坂卓也, 藤波尚弘, 栗原照夫

日本化学会第 91 春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

Molecular Operating Environment (MOE) を用い抗精神病薬 Phenothiazine の標的受容体の網羅的探索

宮前智紀・栗原照夫

日本化学会第 91 春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

Molecular Operating Environment (MOE) による抗 HIV 活性剤 ADAMs の QSAR 解析と逆転写酵素との Docking の検討

小鮎陽介, 坂本武史, 栗原照夫

日本化学会第 91 春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

Molecular Operating Environment (MOE) を用いた血小板凝集阻害剤のアルキル及びアリーールピラジン類の COX-Ligand Docking

吉野龍ノ介, 栗原照夫, 太田明広

第 34 回情報化学討論会 (長崎), 2011 年 11 月

Molecular Operating Environment (MOE) を用いた Phenothiazine 類および Phenoxazine 類の網羅的探索

宮前智紀, 栗原照夫

第 34 回情報化学討論会 (長崎), 2011 年 11 月

四塩化チタンを触媒とする 2-フェニル-1,3-インダンジオンとフェニルヒドラジン類との反応における骨格転位反応

坂ノ下絵里子, 山田岳司, 若林英嗣, 小林啓二

日本化学会第91春季年会(横浜), 2011 年 3 月

1-イミノ-2-アリールインダン-3-オン誘導体の光転位反応

河合正行, 百地 舞, 若林英嗣, 小林啓二

日本化学会第91春季年会(横浜), 2011 年 3 月

粉末X線結晶構造解析による光反応性ジスピロ化合物の擬似多形転移の解明

有田敦子, 中井泉, 関根明子, 植草秀裕, 鈴木雅也, 小林啓二

日本化学会第91春季年会(横浜), 2011 年 3 月

イサチンのスピロ接合体およびキノノイド体の合成と性質

青山礼子, 若林英嗣, 小林啓二

第22回基礎有機化学討論会(つくば), 2011 年 9 月

ニンヒドリンの Umpolung---ヒドラゾンとの反応

今井一則, 高橋舞, 若林英嗣, 小林啓二

第22回基礎有機化学討論会(つくば), 2011 年 9 月

アズレン類とニンヒドリンの反応

山田 裕之, 佐藤 晃, 今井 一則, 小林 啓二, 若林 英嗣

日本化学会第 9 1 回春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

種々のアニリン誘導体によるアミノトロポンイミン及びその金属錯体の合成

蛭田 理恵, 増田 あゆ, 若林 英嗣

日本化学会第 9 1 回春季年会 (横浜), 2011 年 3 月

アルコキシアズレン類とニンヒドリンとの反応

富田 惇輝, 今井 一則, 宮前 博, 小林 啓二, 若林 英嗣

第 22 回 基礎有機化学討論会 (つくば), 2011 年 9 月

Annual Report
城西大学大学院物質科学専攻

第 8 巻 2012 年 3 月 発行

編集・発行 城西大学大学院理学研究科物質科学専攻
〒350-0295 埼玉県坂戸市けやき台 1 - 1
電話 049-271-7728

印刷・製本 (株) 外為印刷
〒111-0032 東京都台東区浅草 2 - 2 9 - 6
電話 03-3844-3855

